

рис. 3. ИК спектры металлоорганической каркасной структуры MIL-88 до и после проведения эксперимента

Список публикаций:

[1] T. Chalati, P. Horcajada, R. Gref, P. Couvreur and C. Serreb; *J. Mater. Chem.*, 21, 2220(2011);

[2] Caroline Mellot-Draznieks, Christian Serre, Suzy Surblé, Nathalie Audebrand, and Gerard Férey; *J. AM. CHEM. SOC.* 9 VOL. 127, NO. 46, (2005);

[3] C. Serre, C. Mellot-Draznieks, S. Surblé, N. Audebrand, Y. Filinchuk, G. Férey; *Science* 315, 1828 (2007);

## Развертка фононных зон методом размывания собственных мод

**Гордиенко Кирилл Алексеевич**

*Кемеровский государственный университет*

*Копытов Анатолий Владимирович, к.ф.-м.н.*

[gordie-kirill@rambler.ru](mailto:gordie-kirill@rambler.ru)

В настоящее время для определения свойств симметрии кристалла популярен метод развертки как электронных [1], так и фононных зон [2,3]. Из анализа результатов развертки можно сделать вывод о влиянии локальных дефектов на свойства всей решетки, о преобладании свойств того или иного вещества в сплаве, о типах подрешеток и т.д.

Методы развертки зон получили большое развитие, прежде всего, в электронной теории твердого тела. Идея метода развертки состоит в разворачивании колебательного спектра расширенной элементарной ячейки (РЭЯ) в зону Бриллюэна, отвечающей элементарной ячейке. Технически, задача развертки заключается в нахождении веса или "доли трансляционной симметрии" ЭЯ в РЭЯ. Методика развертки колебательных спектров является относительно новой, однако исходя из общности свойств состояний как электронной, так и колебательной систем, можно сделать предположение, что и методы развертки для электронных и колебательных спектров могут быть похожи.

В настоящей работе использовался метод "размывания" собственных колебательных мод. Использование этого метода позволяет решать задачу развертки фононных спектров подобными методами электронной теории, для которых требуется использование функций непрерывной переменной.

Определим аналог колебательной моды, сопоставив вектора смещения на атомах (x,y,z) с p-функциями:

$$\Psi_{s\mathbf{Q}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \sum_{\mathbf{A}, i, \alpha} u_{i\alpha}^{(s)}(\mathbf{Q}) p_{\alpha}(\mathbf{r} - \mathbf{\tau}_i - \mathbf{A}) e^{i\mathbf{Q}(\mathbf{\tau}_i + \mathbf{A})}, \quad (1)$$

где  $\Omega$  - объем ЭЯ кристалла,  $\mathbf{\tau}_i$  - положение  $i$ -ого атома в ЭЯ,  $\mathbf{A}$  - вектор решетки,  $u_{i\alpha}^{(s)}(\mathbf{Q})$  - компоненты собственных векторов динамической матрицы [4],  $s$  - номер моды. Далее, благодаря такому виду формулы (1), подчиняющейся теореме Блоха, можно использовать методы развертки, разработанные в электронной теории [1,5], что дает выражение для веса:

$$W_{s\mathbf{Q}}(\mathbf{G}_{\mathbf{Q}}) = \frac{1}{V} \sum_{j=1}^V \sum_{\mathbf{G}} |C_{\mathbf{G}}^{(s)}(\mathbf{Q})|^2 e^{i\mathbf{G}\mathbf{r}_j} \quad (2)$$

С целью проверки предложенного метода, была проведена развертка спектров кристалла алмаза с идеальной решеткой, а также, имеющей локальный дефект (вакансию). Результаты вычислений для расширенной в 4 раза идеальной ячейки (а) и расширенной в 32 раза ячейки с дефектом в виде вакансии (б) представлены на (рис.1).

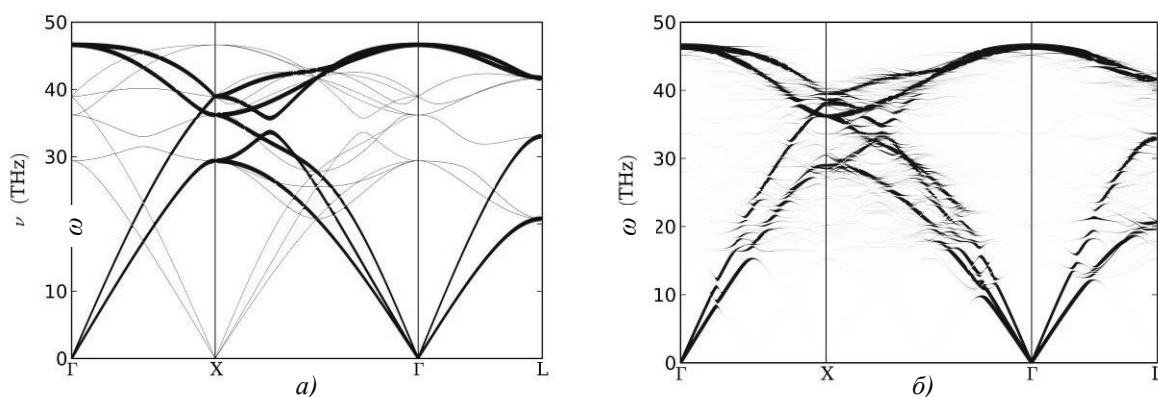


рис.1. Развертка колебательного спектра алмаза а) с расширенной в 4 раза, идеальной ЭЯ б) с расширенной в 32 раза, с дефектом. Толщина линий пропорциональна весу (2).

Как видно из (рис.1.а), развернутый спектр расширенной элементарной ячейки полностью воспроизводит колебательный спектр для стандартной ячейки кристалла алмаза. Таким образом, можно утверждать, что метод работает верно.

На (рис.1.б) видно нарушение в спектре - в ветвях колебательного спектра наблюдаются многочисленные разрывы, это следствие нарушения симметрии решетки - наличия вакансии одного атома углерода. Такие разрывы можно связать с проявлением частот локальных колебаний. Однако, общая форма развернутого спектра, аналогично (рис.1.а) совпадает со спектром для элементарной ячейки кристалла алмаза. Исходя из данных результатов, можно сделать вывод о том, что даже в кристаллах с наличием дефектов и, как следствие, сильно нарушенной симметрией, с помощью метода развертки можно исследовать влияние дефектов на структуру вещества и степень сохранения свойств симметрии исходного кристалла.

Список публикаций:

- [1] Гордиенко А.Б., Кособуцкий А.В. // Анализ электронной структуры кристаллов методом развертки энергетических зон. Физика твердого тела. 2016. Т. 58. № 3. С. 451-457.
- [2] Zeng F., Zhang P. // Phonon dispersion unfolding in the presence of heavy breaking of spatial translation symmetry. Comput. Mat. Sci. 2016. 125, 218.
- [3] Boykin T. B., Ajoy A., Ilatikhameneh H., Povolotskiy M., Klimeck G. // Brillouin zone unfolding method for effective phonon spectra. Phys. Rev. 2014. B. 90. 205214.
- [4] Борн М., Кунь Х. // Динамическая теория кристаллических решеток: Изд-во М.: Ил. 1958. 488с.
- [5] Popescu V., Zunger A. // Extracting  $E$  versus  $\vec{k}$  effective band structure from supercell calculations on alloys and impurities. Phys. Rev. 2012. B. 85. 085201.

## Определение магнитной восприимчивости вещества с помощью рычажных весов

**Груненко Виктория Дмитриевна**

**Федина Ольга Викторовна**

**Северо-Кавказский федеральный университет**

Диканский Юрий Иванович, д.ф.-м.н.

[vika\\_g96@mail.ru](mailto:vika_g96@mail.ru)

Существуют различные методы определения магнитной восприимчивости веществ. Например, с помощью баллистического метода определив намагниченность, можно рассчитать магнитную восприимчивость [1]. Однако недостатками этого метода являются: 1. Сложность проведения эксперимента: необходимо вручную с одинаковой скоростью многократно извлекать образец из соленоида; 2. На внутренних стенках тонкой, но длинной трубки остается большое количество исследуемого материала, иногда очень специфического и дорогостоящего. В статье предлагается метод определения магнитной восприимчивости веществ с помощью рычажных весов.